

# ДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЯДЕРНОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ Cr–TiSe<sub>2</sub>

*Н. В. Селезнёва, В. А. Горбунов*

*Уральский государственный университет, г. Екатеринбург, hope\_s@mail.ru*

Свойства материалов связаны с их кристаллической структурой, поэтому нахождение взаимосвязи физических свойств с внутренним строением соединений является неотъемлемой частью любого исследования. Для уточнения кристаллической структуры в ряде случаев необходимо использовать комплекс неразрушающих методов, к которым относятся и дифракционные методы. С использованием набора высокотехнологичного оборудования дифракционные методы анализа дают возможность получать разностороннюю информацию практически обо всех важнейших параметрах вещества, таких как его состав, кристаллическое совершенство, атомное строение, энергетическая и электронная структуры и прочее.

Рентгенографические и нейтронографические методы исследования во многом схожи – оба метода дифракционные, но они обладают характерными особенностями, определяющими область их применения. Для нейтронографии успешно применяют теорию дифракции развитую для рентгенографии. Различие определяется различной природой взаимодействия излучений с веществом. Рентгеновские лучи рассеиваются на электронных оболочках атомов (в основном внутренних), взаимодействие описывается функцией распределения электронной плотности  $\rho(x,y,z)$ . Ядра атомов практически не принимают участия в рассеянии (во столько раз меньше, во сколько различаются массы ядра и электрона). В рентгенографии возникают трудности с выявлением легких атомов (с маленькими порядковыми номерами  $Z$ , то есть с малым числом электронов) на фоне тяжелых атомов, а также атомов с близкими порядковыми номерами в таблице Менделеева. Намного легче это решается в нейтронографии вследствие немонотонной зависимости амплитуды рассеяния.

Важность нейтронографии при исследовании веществ определяется совершенно уникальными свойствами, которыми обладают нейтроны. Во-первых, нейтрон обладает колоссальной чувствительностью, контрастностью в различении элементов таблицы Менделеева в веществе. С помощью нейтронов можно обнаруживать легкие элементы, что нельзя сделать с помощью рентгеновских и гамма-лучей, можно различать даже изотопы. Во-вторых, нейтрон имеет магнитный момент, это позволяет изучать магнитную структуру и магнитные возбуждения в веществе. В-третьих, можно получать пучки нейтронов с такой энергией, что она будет сравнима с энергией элементарных возбуждений в материале. Это означает, что помимо среднестатистической картины этого материала можно получать сведения о динамике процессов, происходящих в том или ином материале. Эти качества, вместе с высокой проникающей способностью нейтронов (нейтрон незаряженная частица), определяют широкую сферу применения нейтронов.

В настоящем докладе на примере системы Cr–TiSe<sub>2</sub> показан комплексный подход в использовании обоих методов исследования, который позволяет получить более точную и полную информацию о кристаллической и магнитной структуре.

По данным рентгенодифракционного анализа, проведенного на поликристаллических образцах системы Cr<sub>x</sub>TiSe<sub>2</sub> ( $0 < x \leq 0.60$ ), нами установлено, что при увеличении концентрации хрома наблюдаются структурные фазовые переходы, приводящая к изменению симметрии решетки: при  $x \leq 0.20$  гексагональная (пр. группа  $P-3m1$ ) → при  $x = 0.25$  моноклинная сингония (пр. группа  $F12/m1$ ) → при  $x = 0.30$  гексагональная (пр. группа  $P-3m1$ ) → при  $x = 0.33$  гексагональная (пр. группа  $P-31c$ ) → при  $0.50 \leq x \leq 0.60$

моноклинная сингония (пр. группа  $I12/m1$ ) [Плещев и др., 2009]. При уточнении кристаллической структуры методом полнопрофильного анализа (программа Fullprof [Rodriguez-Carvajal, 1993]) для всех составов получен достаточно хороший модельный фактор  $R_{F2} \sim 4\%$ , без учёта возможного перемешивания атомов хрома и титана. В данном случае учёт замещения атомов металла затруднен, т.к. в случае использования рентгеновского излучения структурные факторы атомов хрома и титана при рассеивании близки. Исследования образца  $\text{Cr}_{0.5}\text{TiSe}_2$  с помощью магнитной нейтронографии подтвердили как наличие такого перемешивания, так и сложный характер его магнитной структуры [Baranov, 2005]. Для данной системы факт замещения имеет принципиальный характер, т.к. приводит к существенному уменьшению температуры магнитного превращения. Согласно данным нейтронографии магнитные моменты хрома, расположенные в одной Ван-дер-Ваальсовой щели в соединении  $\text{Cr}_{0.5}\text{TiSe}_2$  упорядочиваются почти параллельно друг другу вдоль цепочек выстроенных в направлении оси  $b$ . При этом взаимодействие между спинами ионов хрома, расположенных в соседних щелях, носит антиферромагнитный характер. Замещение хрома титаном в щели должно приводить к ослаблению внутрислоевых обменных взаимодействий ферромагнитного характера. В то же время, замещение титана хромом в Se-Ti-Se сэндвичах, по-видимому, вызывает усиление обменного взаимодействия между слоями.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 09-02-00441-а).*

### Литература

- Плещев В. Г., Максимов В. И., Селезнёва Н. В., Королев А. В., Подлесняк А., Баранов Н. В.* Особенности структуры, магнитные свойства и теплоемкость интеркалированных соединений  $\text{Cr}_x\text{TiSe}_2$  // ФТТ. 2009. Т. 51. № 5. С. 885–891.
- Baranov N. V., Titov A. N., Maksimov V. I., Toporova N. V., Daoud-Aladine A., Podlesnyak A.* Antiferromagnetism in the ordered subsystem of Cr ions intercalated into titanium diselenide. // J. Phys. Condensed Matter. 2005. V. 17. P. 5255–5262.
- Rodriguez-Carvajal J.* Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction // Physica B. 1993. V. 192. P. 55–69.